

MÉTHODE DE MONTE CARLO ET SYNTHÈSE D'IMAGES : APPLICATION À DES MILIEUX DIFFUSANTS EN TRANSFERT RADIATIF

Julien Yves ROLLAND*, Mouna EL HAFI*, Richard FOURNIER**, Stéphane BLANCO**,
Mathias PAULIN***

* *École des Mines d'Albi Carmaux - UMR CNRS 2392 - Albi, France*

** *LAPLACE - UMR CNRS 5213 - Université Paul Sabatier - Bât. 3R1 - 118, route de Narbonne -
Toulouse, France*

*** *IRIT - UMR CNRS 5505 - Université Paul Sabatier - 118 Route de Narbonne, Toulouse, France
e-mail : julien.rolland@enstimac.fr*

Résumé L'objectif principal de cette étude est la prise en compte de la diffusion multiple pour le calcul de transferts radiatifs dans des géométries complexes. Pour traiter la diffusion, un algorithme basé sur la méthode de Monte Carlo a été développé et implémenté dans un environnement issu d'un code de synthèse d'images existant. A l'aide de propriétés d'invariance de la statistique des chemins de diffusion multiple, nous avons validé cette approche dans le cas de trois géométries tridimensionnelles usuelles : sphère, cylindre et pyramide.

1 INTRODUCTION

Les problèmes de transfert radiatif associés à de fortes épaisseurs optiques de diffusion (libre parcours moyen de diffusion très faible devant la dimension du système) sont nombreux. En ce qui concerne les problématiques étudiées au sein des deux laboratoires LAPLACE et RAPSODEE, il s'agit essentiellement du rayonnement solaire dans les nuages atmosphériques terrestres, du rayonnement infrarouge dans les nuages vénusiens, du rayonnement infrarouge dans les systèmes en combustion hétérogène, des échangeurs à lits fluidisés pour l'énergie solaire concentrée et enfin des techniques d'imagerie médicale. Dans chaque cas, deux types de questions scientifiques se posent simultanément :

- Le calcul suffisamment rapide et précis de solutions de référence.
- L'analyse détaillée de la statistique des chemins optiques de multi-diffusion, en vue de la proposition de schémas interprétatifs à l'échelle macroscopique et de paramétrisation adaptées (évaluation rapide des échanges énergétiques permettant une inversion rapide ou un couplage avec d'autres mécanismes physiques tels que chimie et dynamique des fluides).

Ces questions soulèvent des difficultés d'ordre méthodologiques qui nous ont récemment conduit à plusieurs développements significatifs [1, 2]. Nous avons d'abord cherché à mettre en oeuvre en géométrie tridimensionnelle complexe l'ensemble des méthodes de Monte Carlo optimisées dont nous disposions [3, 4]. Pour cela, nous avons lancé une collaboration avec l'IRIT afin de bénéficier de l'ensemble des développements récents des algorithmes de suivi de rayon dans le domaine de la synthèse d'image [5, 6]. Ensuite nous avons travaillé à la systématisation des calculs de sensibilité au sein de la méthode de Monte Carlo (à la fois pour l'analyse de mécanismes et le développement de paramétrisations de type linéaire) [7, 1]. Enfin, nous avons poussé aussi loin que possible les techniques d'analyse que nous avons à notre disposition, en particulier celles issues de la Physique statistique hors d'équilibre [8, 2]. Aujourd'hui, ces éléments théoriques forment un ensemble qui nous permet d'envisager le développement

d'outils informatiques performants dans le contexte scientifique défini ci-dessus. A l'heure actuelle, nous pouvons disposer de bibliothèques complètes et fiables comme base géométrique pour l'ensemble de nos développements. C'est le cas notamment de la bibliothèque du code PBRT (Physically Based Rendering Techniques) qui nous servira de point de départ dans le travail présenté ci-dessous [9]. Nous allons tester, pour des géométries tridimensionnelles simples, les propriétés statistiques identifiées dans [8] et [2] et qui n'ont pour l'instant été contrôlées numériquement qu'en géométries mono dimensionnelles et bidimensionnelles. La première de ces propriétés est la suivante : pour un quelconque système tridimensionnel Ω de volume V , de frontière $\partial\Omega$ de surface S , constitué d'un milieu purement diffusant hétérogène, si l'on considère un ensemble de photons entrant uniformément, de façon isotrope à la frontière, la longueur moyenne $\langle L \rangle$ des chemins optiques au sein de Ω , jusqu'à la première sortie, est indépendant du type de diffusion (libre parcours moyen et fonction de phase) et prend la valeur

$$\langle L \rangle = 4V/S \quad (1)$$

Cette propriété d'invariance est la traduction d'un mécanisme de compensation des chemins courts et des chemins longs : lorsque l'on réduit le libre parcours moyen de diffusion, des chemins optiques de plus en plus courts apparaissent avec des probabilités de plus en plus fortes (réflexion après quelques diffusions), mais il apparaît également quelques rares chemins dont la longueur est très grande (des photons parvenant à pénétrer assez profondément dans le système et qui ont ensuite besoin de beaucoup de diffusions pour sortir du système) et qui assurent la constance de la valeur moyenne des longueurs. Ce mécanisme de compensation est très utile dans un contexte d'analyse et de paramétrisation. En effet, il devient possible de raisonner sur les chemins longs (qui sont faciles à aborder grâce à l'approximation de diffusion) pour en déduire des propriétés concernant les chemins courts (qui sont à l'origine des principales difficultés théoriques associées aux questions de diffusions multiples). C'est cette idée qui est à l'origine des propositions faites dans [2] et que nous allons tester ici pour des géométries réalistes. Sans présenter ici l'ensemble des raisonnements correspondants, nous retiendrons qu'il est possible d'estimer très rapidement la moyenne $\langle f(L) \rangle$ d'une quelconque fonction f de la longueur de chemin pourvu que f admette une limite finie en 0 et que le libre parcours moyen de diffusion soit petit devant la taille du domaine. En particulier, si f est un monôme d'ordre n , on obtient que L^n est proportionnel à l'inverse du libre parcours moyen de transport λ^* à la puissance $n - 1$, soit

$$\langle L^n \rangle = \alpha_n \frac{1}{\lambda^{*n-1}} \quad (2)$$

avec $l^* = \frac{\lambda}{1-g}$ où λ est le libre parcours moyen de diffusion, g le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase, et où α_n est une fonction de la géométrie du système qui peut être déterminée de manière assez rapide par une résolution instationnaire de l'équation macroscopique de diffusion [2].

Ici, nous testerons $\langle L \rangle$ et $\langle L^2 \rangle$ dans le cas de géométries simples en utilisant la bibliothèque géométrique du code PBRT (de tels tests n'ayant été menés qu'en géométrie mono dimensionnelle dans [2]). Dans la section 2, nous présentons rapidement les méthodes utilisées. Dans la section 3 nous donnons l'algorithme de diffusion multiple utilisé et les résultats obtenus sur les trois géométries. Les coefficients α_1 obtenus numériquement sont comparés à la solution analytique $\alpha_1 = 4V/S$. Les coefficients α_2 ($n=2$) seront comparés ultérieurement à des calculs utilisant une résolution de l'équation macroscopique de diffusion comme proposé dans [2].

2 MÉTHODE DE MONTE CARLO (MCM) ET DIFFUSION MULTIPLE

2.1 Monte Carlo et synthèse d'image

Nous avons fait le choix d'utiliser un outil récent de calcul en synthèse d'image : Physically Based Rendering Techniques [9]. Il est constitué d'une bibliothèque d'objets programmés en C^{++} , dont la structure actuelle hérite du savoir-faire et des réflexions menées par les chercheurs en informatique durant ces vingt dernières années. Les classes d'objets constituant la bibliothèque ont été conçus de manière optimale et reflètent l'état actuel des réflexions menées jusque là pour la définition de ces objets. Il est intéressant de profiter de l'existence de ces outils pour étendre cette approche au calcul des transferts radiatifs avec la prise en compte de la complexité spectrale des gaz participants ou des phénomènes de diffusion multiple. Dans PBRT, les techniques d'accélération de suivi de rayons ainsi que les techniques de subdivision de grilles pour la voxélisation sont les techniques standards utilisées en synthèse d'image. Ce code, produit de plusieurs années de travail et qui a donné lieu à de nombreuses validations, représente pour nous un excellent outil de développement dans lequel nous incluons la partie algorithmique concernant les calculs de transfert radiatif basés sur la MCM. Dans l'étude présentée, il s'agit d'introduire un algorithme permettant de prendre en compte la diffusion multiple à l'aide de la méthode de MCM.

2.2 Description de la méthode de Monte Carlo

Les méthodes de Monte Carlo sont basées sur une description stochastique du transport de corpuscules. Lorsqu'elles sont utilisées de manière analogue, elles consistent à simuler le suivi de photons depuis leur lieu d'émission jusqu'à leur absorption. Statistiquement parlant, elles consistent à calculer la moyenne $\langle I \rangle$ d'une observable aléatoire O réalisée un grand nombre de fois $I \simeq \langle O \rangle_N$.

Selon un autre point de vue, ces méthodes permettent de calculer des intégrales multiples : à tout calcul de la moyenne d'une observable, peut être associé un calcul intégral. Par exemple,

pour évaluer l'intégrale $I : I = \int_a^b f(x)dx$

l'introduction d'une densité de probabilité $p_X(x)$ définissant une variable aléatoire X permet de récrire I sous la forme : $I = \int_a^b p_X(x) \frac{f(x)}{p_X(x)} dx = \int_a^b p_X(x) w_I(x) dx$ où $w_I(x) = \frac{f(x)}{p_X(x)}$ représente la fonction poids de Monte-Carlo associée au calcul de I . Si on définit la variable aléatoire $W_I = \frac{f(X)}{p_X(X)}$, l'intégrale I est égale à l'espérance de W_I : $I = E(W_I) = \langle W_I \rangle_{N \rightarrow +\infty}$

On génère alors aléatoirement une série de réalisations $\{x_i\}_{i=1,N}$ de la variable aléatoire X dont on déduit une série de réalisations $\{w_{I,j} = w_I(x_j)\}_{j=1,N}$ de la variable aléatoire W_I . Il est à noter que tout un travail de formulation mathématique sur ces écritures intégrales a été effectué et permet ainsi de diminuer les variances associées au calcul de I [3, 4].

3 CALCUL DU TRAJET DE DIFFUSION

Comme il a été mentionné en introduction, afin de valider le développement du traitement de la diffusion que nous implémentons dans PBRT, nous allons confronter des résultats de simulation à un résultat analytique : l'existence d'invariants dans le calcul de la longueur du trajet de diffusion.

Demarche algorithmique Nous utilisons un algorithme de Monte-Carlo déduit d'une approche analogue. Nous considérons un volume prédéfini purement diffusant soumis à un rayonnement ambiant uniforme. L'algorithme analogue présenté ici consiste en une simulation du trajet optique de N photons et d'un calcul systématique de la longueur de ce trajet, en fonction des diffusions, jusqu'à la sortie du photon. La grandeur calculée est la longueur du trajet effectué par diffusion au sein de la géométrie. Cette grandeur s'exprime par l'intégrale multiple de

dimension infinie suivante :

$$L = \int_S P_{\mathbf{X}_0}(\mathbf{X}_0) d\mathbf{X}_0 \int_{2\pi} P_{\mathbf{U}_0}(\mathbf{U}_0) d\mathbf{U}_0 \int_0^{+\infty} P_{\sigma_0}(\sigma_0) d\sigma_0 \left[H(\sigma_0, \mathbf{X}_0, \mathbf{U}_0) l_0 + \right. \quad (3)$$

$$\left. G(\sigma_0, \mathbf{X}_0, \mathbf{U}_0) \int_{4\pi} P_{\mathbf{U}_1}(\mathbf{U}_1) d\mathbf{U}_1 \int_0^{+\infty} P_{\sigma_1}(\sigma_1) d\sigma_1 [H(\sigma_1, \mathbf{X}_0, \mathbf{U}_1) l_1 \dots \right.$$

où H est une fonction de test de sortie de la géométrie qui vaut 1 si la particule sort et zéro autrement, G qui a le comportement contraire, \mathbf{X}_0 position d'entrée, \mathbf{X}_i la position de diffusion i , \mathbf{U}_i direction de la diffusion i , σ_i longueur entre la diffusion $i - 1$ et i et l_i le trajet parcouru depuis l'entrée ($\sum \sigma_{i-1}$) plus la longueur du trajet d_i depuis \mathbf{X}_i jusqu'à sortie dans la direction \mathbf{U}_i .

Géométries utilisées Nous effectuerons le suivi du photon à travers 3 géométries simples distinctes : une sphère, un cylindre et un tétraèdre régulier. Ces 3 géométries ont pour avantage de mettre en jeu différents modules de PBRT, de complexité croissante, et représentent des géométries élémentaires dans la description d'objets plus complexes.

La diffusion dans ces volumes sera caractérisée par un coefficient de diffusion K_d constant et une modélisation de la fonction de phase d'Henye-Greenstein.

Cette formulation intégrale se traduit par l'algorithme suivant, où les densités de probabilités sont détaillées (cf. figure 1).

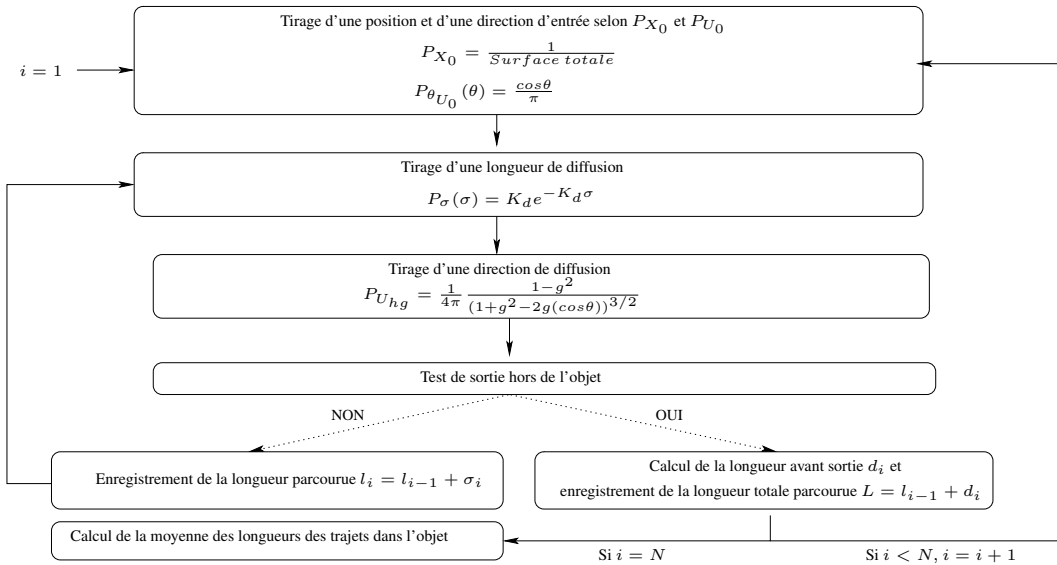


FIG. 1 – Algorithme analogue de diffusions multiples dans une géométrie donnée, pour des fonctions de phase d'Henye-Greenstein avec détail des fonctions de densité de probabilités utilisées.

4 RESULTATS ET PERSPECTIVES

Les simulations de diffusions multiples effectuées sous PBRT par une méthode de Monte Carlo analogue nous ont permis de retrouver des invariants statistiques dans des géométries 3D simples (cf. figure 2). Le comportement linéaire du moment d'ordre 2 en fonction de l'inverse du libre parcours moyen a été confirmé et la validation quantitative reste à faire par la résolution de l'équation macroscopique de la diffusion. Le succès de la mise en oeuvre de ce code va se poursuivre par une application à des cas plus concrets : nous envisageons d'appliquer l'algorithme de diffusion à l'imagerie médicale (simulation dans une boîte crânienne) mais aussi d'implémenter un calcul des sensibilité pour disposer d'un outil plus complet en terme d'analyse.

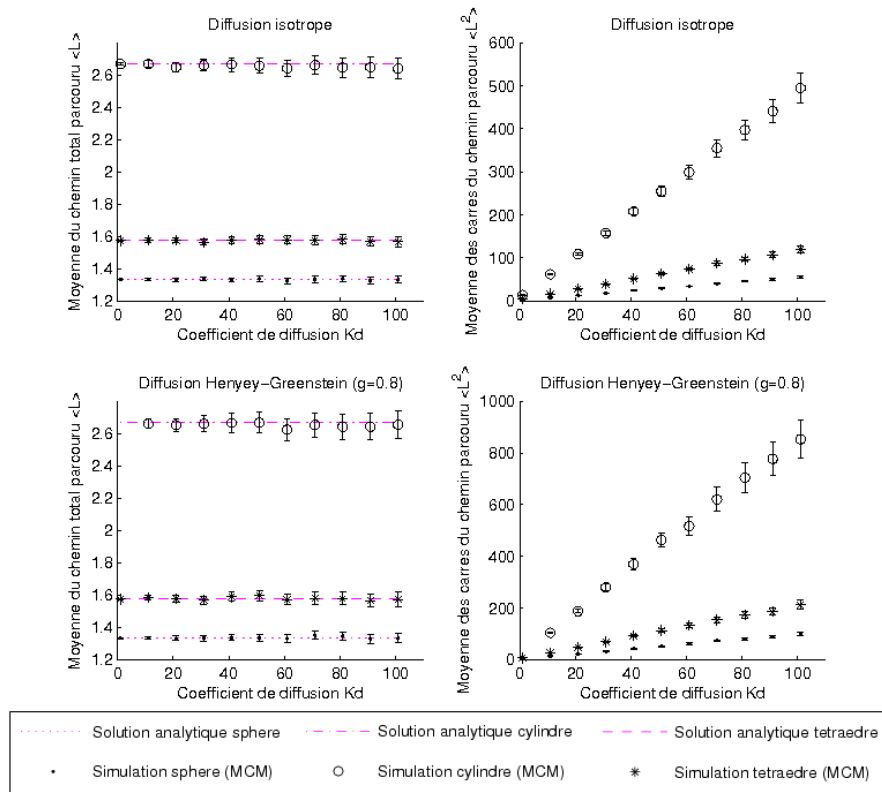


FIG. 2 – Représentations des moments d'ordre 1 et 2 (eq. 1 et 2) des longueurs moyennes en fonction du coefficient de diffusion K_d et du paramètre d'asymétrie g pour les trois types de géométries avec barres d'erreurs.

REFERENCES

1. Maxime Roger, Stéphane Blanco, Mouna El Hafi, and Richard Fournier. Monte Carlo estimates of domain-deformation sensitivities. *Physical Review Letter*, 95(18), october 2005.
2. S. Blanco and R. Fournier. Short-path statistics and the diffusion approximation. *Physical Review Letters*, 97(230604), 2006.
3. A. de Lataillade A., J.L. Dufresne, M. El Hafi, V. Eymet, and R. Fournier. A net exchange monte carlo approach to radiation in optically thick systems. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2002.
4. V. Eymet, R. Fournier, S. Blanco, and J.L. Dufresne. A Boundary-Based Net Exchange Monte-Carlo Method for absorbing and scattering thick media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2005.
5. Patrice Perez. Algorithmes de synthèse d'images et propriétés spectrales de gaz de combustion : Méthode de Monte Carlo pour la simulation des transferts radiatifs dans les procédés à haute température. *Thèse INP Toulouse n°1980*, 2003.
6. M. El Hafi. ATIP, CNRS, Algorithmes de Monte Carlo pour la simulation des transferts radiatifs, partenaires : LAPLACE, IRIT, ONERA. *rapport de contrat*, 2004.
7. A. de Lataillade, S. Blanco, Y.Clergent, J.L. Dufresne, M. El Hafi, and R. Fournier. Monte Carlo method and sensitivity estimations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 75 :529–538, 2002.
8. S. Blanco and R. Fournier. An invariance property of diffusive random walks. *Europhysics Letters*, 61(2) :168–173, 2003.
9. Greg Humphreys Matt Pharr. *Physically Based Rendering, from theory to implementation*. Elsevier Inc., 2004.